

第一原理計算による a-SiO₂ 中の点欠陥の荷電特性の検討

First-principles Study of Charging Properties of Points Defects in a-SiO₂

千葉大理¹ [○](M1)白石 悠人¹, 山崎 翔太¹, 中山 隆史¹

Chiba Univ.¹, [○]Yuto Shiraishi¹, Shota Yamazaki¹, Takashi Nakayama¹

E-mail: aeta1804@chiba-u.jp

SiO₂絶縁膜中に金属ナノドットを入れた系は、電圧を印加するとドットに正負の電荷を貯めることができるため、そのメモリーへの応用が期待されている[1]。しかし、繰り返し帯電するとその電荷保持力が劣化することも知られている[2]。我々はこれまでに、第一原理計算を用いて、どの金属種のナノドットが熱力学的及び帯電時に安定か、ドットから解離拡散してイオン化した金属原子がナノドットの電荷保持力がどれだけ低下させるかを検討した[3]。しかし、電荷保持力を低下させる原因は、解離拡散した金属原子だけではなく、SiO₂中の他の欠陥も考えられる。そこで本研究では、第一原理計算を用いて、a-SiO₂中の点欠陥（Si・O空孔、格子間 Si・O・H、及び格子間金属原子）の荷電特性を調べ、これら欠陥のどれが電荷保持力の劣化に影響を及ぼすかを検討した。

SiO₂には、α quartz と同じ密度(2.6g/cm³)で Si が 24 個、O が 48 個からなる a-SiO₂ (Fig.1(a)の amorphous SiO₂ の unit cell)を用いた。この中に欠陥を作り、その荷電特性を調べた。第一原理計算には VASP code を用いた。Fig.1(b)に、様々な点欠陥が正及び負に帯電するために必要な電極のフェルミエネルギー位置を、SiO₂のバンドギャップの中で示した。解離しにくい安定な W の場合、格子間 W 原子は発生しないが、格子間 O・H 欠陥が帯電電荷のリークに寄与することがわかるので、これら欠陥が発生しない SiO₂膜を利用した方がよいことが分かる。講演では、異なる密度の a-SiO₂ の場合も同様に計算し、電荷保持劣化の主要原因について議論したい。

[1] Y.Pei et al., SDM 2008 report, p.58. [2] M. S. Lee et al., Jpn. J. Appl. Phys. 46, 6202 (2007). [3] 山崎翔太 他, 電子デバイス界面テクノロジー研究会 (2018).

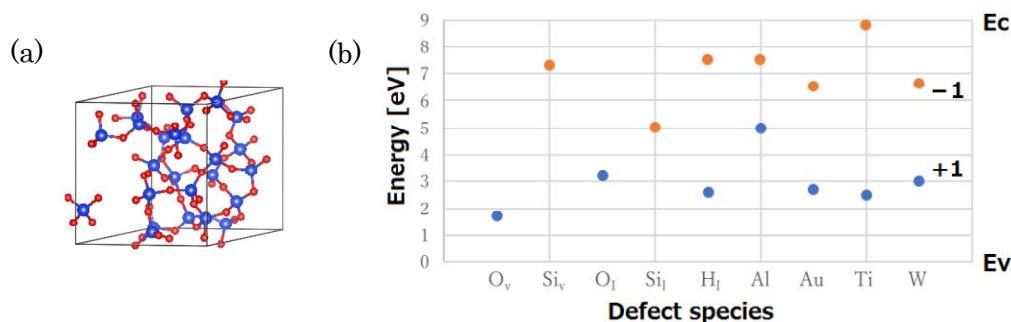


Fig.1 (a) Schematic picture of a-SiO₂ unit cell adopted in this study. (b) Calculated energy positions to produce positively (+1: blue) and negatively (-1: orange) charged defects, in the band gap of a-SiO₂. Ec and Ev correspond to the conduction-band bottom and valence-band top, respectively.